

# STRUTTURISTICA CHIMICA

programma svolto nell'anno accademico 2005-2006

Metodo VSEPR e geometria molecolare:

- Influenza del numero di coppie di elettroni del guscio di valenza sulla struttura geometrica delle molecole, domini delle coppie elettroniche, deviazioni dagli angoli ideali di legame, effetto dell'elettronegatività del legante, legami multipli, legami a più centri, lunghezze dei legami, limiti del metodo VSEPR.

Teoria dei Gruppi:

- Elementi e operazioni di simmetria, identificazione del gruppo di simmetria di appartenenza delle molecole.
- Tavola delle moltiplicazioni; Rappresentazioni riducibili ed irriducibili; Ortonormalità delle rappresentazioni; Tavola dei caratteri (gruppi  $C_{2v}$  e  $C_{3v}$ ); Rappresentazioni Degeneri; Riduzione di una rappresentazione, Operatori di proiezione; Prodotto diretto delle rappresentazioni
- Applicazione della teoria dei Gruppi alla descrizione del legame chimico: semplificazione del determinante secolare e costruzione del diagramma energetico della molecola (molecole lineari e non lineari, molecole cicliche).
- Vibrazioni molecolari: rappresentazione totale del movimento degli atomi che compongono la molecola; rappresentazioni traslazionali, vibrazionali e rotazionali.
- Applicazione della teoria dei Gruppi allo studio della spettroscopia vibrazionale: spettroscopia IR e spettroscopia Raman

Molecole biatomiche: equazione di Schrödinger, funzioni d'onda rotazionali e vibrazionali; energia di rotazione, energia di vibrazione (oscillatore armonico e anarmonico); popolamento dei livelli energetici, spettro della molecola CO; transizioni tra stati stazionari

Molecole poliatomiche: modi normali di vibrazione, coordinate normali, simmetrie dei modi di vibrazione (modi di stretching e di bending); coordinate di simmetria; regole di selezione ottenute dalla simmetria delle funzioni d'onda; diagrammi di correlazione,

Individuazione della struttura di un composto dal confronto teorico-sperimentale degli spettri IR e/o Raman.

Il Docente

Claudine Gorse